

有機材料生油潛能評估參數統計分析

李顯宗^{1,3} 蔡龍珪² 孫立中³

¹國立中央大學地球物理研究所

²國立中央大學應用地質研究所

³南開技術學院電機工程系

摘要

有機材料進行鏡煤素反射率量測、熱裂分析，可取得 Ro、TOC、Tmax、HI(S2/TOC)、QI((S1+S2)/TOC)、BI(S1/TOC)、PI(S1/(S1+S2))、S1+S2、S1、S2 等參數，用以顯示有機材料的特徵，並評估其生油潛能。然當使用個別參數作判斷時，易造成高估或低估之情形發生。因此本研究以 553 個樣品，探討前述各項參數間相關性。結果顯示有機材料隨著熱成熟度(Ro、Tmax)增加，其 HI、QI、BI、PI、S1、S2 值將升高，至 Ro(%)=0.6~1.0 時逐漸下降，當 Ro(%)>1.0 時，其 HI、QI、BI、PI、S1、S2 值將快速減少，導致生油潛能迅速減弱。

前言

Rock-Eval 熱裂分析，可以少量樣品，快速、便宜、廣泛用於源岩的熱成熟與生油潛能探討分析，這也使得地球化學在生油潛能評估研究上有相當的進展。由 Rock-Eval 熱裂分析所獲得的樣品總生烴潛能資料主要是依據氫指數(HI, S2/TOC)、氧指數(OI, S3/TOC)、瀝青指數(BI, S1/TOC)(Killops et al., 1998)及品質指數(QI, (S1+S2)/TOC)(Pepper and Corvi, 1995)等參數判定。有機材料生烴潛能與油母質熱成熟度有關，而評估油母質熱成熟度的最佳指標之一即為鏡煤素反射率值(Ro%)，但 Ro%的量測會受到三項因素影響，人為誤差、技術問題、及由於有機質的結構與組成不均勻性所衍生之問題，前二項因素可依國際的標準作業流程 ASTM 及 ISO 等予以克服，而屬於最後一項的反射率抑制及統計問題(關於量測點數少、再沉積樣品等)是較不易克服的，必須以統計分析的方法處理鏡煤素反射率量測值，方能得出較適合的油母質成熟度指標 Ro%值。

對煤樣而言，易因偏高的 HI 值而高估其生烴潛能，所以 Peters(1986)認為決定煤的生烴潛能須再配合元素分析所獲得的 atomic H/C 值及有機岩相分析等參數。然而由其後一些學者的研究發現 atomic H/C 與 HI 等參數在生烴潛能評估上，不易得到較可行的相互關係(Powell et al., 1991; Bostick and Daws, 1994; Yeakel, 1994)。Petersen and Rosenberg(2000)認為煤樣的成熟度值(Ro%)與 HI 的相關性不是很好，一般而言，隨煤樣成熟度值(Ro%)增加，其 HI 值將減少，亦即生油潛能將降低。另有些研究認為 HI 值與揮發質(一般為低分子量烴類)有很強的相關性，

可據以評估生油潛能(Suggate and Boudou, 1993; Newman et al., 1999)。總而言之，所有的 Rock-Eval 參數是與有機質的熱成熟度及型態有關的，可以統計分析的方法探討各參數間之相互關係評估有機材料生油潛能。對煤樣而言其 Rock-Eval 參數(如 BI, HI, QI 等)與熱成熟度(煤級)間的相互關係較複雜，可藉著使用各種煤級與 Rock-Eval 參數資料作圖，探討煤樣的熱成熟演變及生油潛能情形。

方法

以 553 個樣品(36 個台灣地區、16 個大陸地區、13 個澳洲地區樣品、488 個取自文獻)的各項生油潛能評估參數資料，如 Ro、TOC、Tmax、HI(S2/TOC)、QI((S1+S2)/TOC)、BI(S1/TOC)、PI(S1/(S1+S2))、S1+S2、S1、S2 等參數，用相關、迴歸、主成分、因素及群集等統計分析方法，探討有機材料各項參數間的相關性，並綜合統計評估有機材料生油潛能。這 553 個樣品年代從石炭紀至新生代，岩性涵蓋煤、腐殖煤、頁岩、泥岩、砂岩等，這些有機材料樣品以油母質(kerogen)分類是屬於油母質 II/III 型(Kerogen Type II/III)。

結果與討論

結果顯示，大多數樣品各項參數值隨鏡煤素反射率 Ro 值增大而增加，至 Ro(%)值=0.6~1.0(Tmax(°C)=430~450)時各項參數值將逐漸減少，當 Ro(%)值>1.0 (Tmax(°C)>450)時，各項參數值將加速變小(圖一)，以所有樣品之 Tmax 對 Ro 線性迴歸分析可得 $R^2=0.736$ 顯示良好的相關性(圖二)。一般而言，HI 值小於 80(mg/g TOC)的樣品其 S1+S2 及 S2 值小於 8.0(mg/g)、S1 值小於 0.33(mg/g)、BI 值小於 63.0(mg/g TOC)、QI 值小於 167.0(mg/g TOC)、TOC 值小於 18.3(w%)，呈現不佳的生油潛能。所有樣品各項參數相互間之相關分析結果(表一)顯示 Tmax 與 Ro 相關性佳，S1+S2、TOC、S1、S2 相互間有較好的相關性，此外，HI 與 QI 亦呈現不錯的相關性。另由主成分、因素及群集分析可將各項參數區分為四類：(1) S1+S2、TOC、S1、S2 (2)HI、QI (3)Tmax、Ro (4)BI、PI 等，此與相關分析結果相符。若以 Ro(%)=1.02~3.43 的 80 個樣品各項參數相互間之相關分析，亦可得到前述相似之結果(表二)，然特別須留意的是 Tmax、Ro 與 HI、QI 呈現較前述(表一)為佳的結果，由各項參數的多元迴歸分析(multiple regression analysis)結果，也可得知以 Ro(%)=1.02~3.43 的 80 個樣品各項參數相互間之相關性較佳(圖三)，且具有較高的 adjusted R^2 值(表三)。由此可確定，當有機材料之 Ro 值大於 1.0 時，其 HI、QI、S2、S1 值將隨 Ro 及 Tmax 值的升高而迅速降低，使樣品的生油潛能也快速變差。因此，有機材料隨著成熟度增加時，若 HI、QI、S2、S1 值沒有同步增大，至 Ro(%)>1.0 (Tmax(°C)>450) 時，將很難呈現好的生油潛能。

表一 553 個樣品之各項參數相互間相關性分析資料 (Ro%)=0.17~3.43 ; N=553)

Correlation analysis		Ro%	Tmax	S2/TOC	S1+S2	TOC	S1/TOC	(S1+S2)/TOC	S1/(S1+S2)	S1	S2
Ro%	Pearson Correlation	1	0.860	-0.334	-0.152	0.186	-0.098	-0.334	0.176	-0.093	-0.153
Tmax	Pearson Correlation	0.860	1	-0.189	-0.085	0.183	-0.121	-0.200	0.042	-0.052	-0.086
S2/TOC	Pearson Correlation	-0.334	-0.189	1	0.578	0.238	0.370	0.968	-0.282	0.407	0.577
S1+S2	Pearson Correlation	-0.152	-0.085	0.578	1	0.816	0.038	0.514	-0.295	0.706	0.999
TOC	Pearson Correlation	0.186	0.183	0.238	0.816	1	-0.145	0.203	-0.307	0.575	0.816
S1/TOC	Pearson Correlation	-0.098	-0.121	0.370	0.038	-0.145	1	0.458	0.462	0.366	0.020
(S1+S2)/TOC	Pearson Correlation	-0.334	-0.200	0.968	0.514	0.203	0.458	1	-0.230	0.429	0.510
S1/(S1+S2)	Pearson Correlation	0.176	0.042	-0.282	-0.295	-0.307	0.462	-0.230	1	-0.062	-0.303
S1	Pearson Correlation	-0.093	-0.052	0.407	0.706	0.575	0.366	0.429	-0.062	1	0.679
S2	Pearson Correlation	-0.153	-0.086	0.577	0.999	0.816	0.020	0.510	-0.303	0.679	1

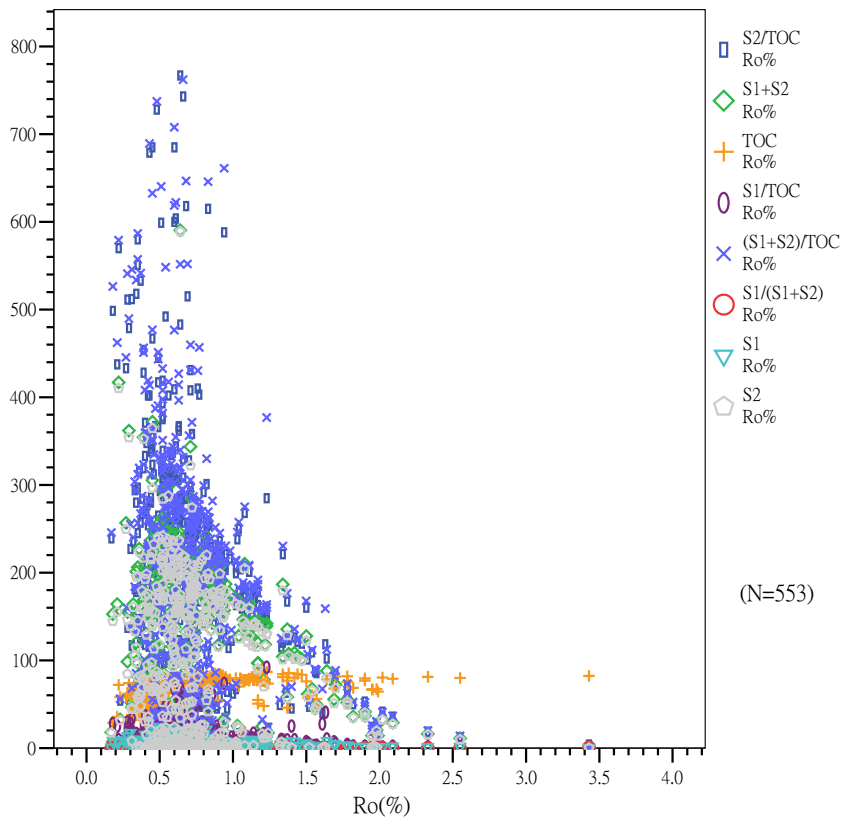
表二 80個鏡煤素反射率值大於 1.0 樣品 (Ro%)=1.02~3.43 ; N=80) 之各項參數相互間相關性分析資料

Correlation analysis		Ro%	Tmax	S2/TOC	(S1+S2)/TOC	S1/TOC	S1/(S1+S2)	S2	TOC	S1+S2	S1
Ro%	Pearson Correlation	1	0.812	-0.721	-0.721	-0.201	0.504	-0.469	0.098	-0.470	-0.361
Tmax	Pearson Correlation	0.812	1	-0.589	-0.652	-0.453	0.049	-0.252	0.283	-0.251	-0.169
S2/TOC	Pearson Correlation	-0.721	-0.589	1	0.948	0.374	-0.264	0.666	0.158	0.667	0.504
(S1+S2)/TOC	Pearson Correlation	-0.721	-0.652	0.948	1	0.477	-0.217	0.603	0.045	0.603	0.433
S1/TOC	Pearson Correlation	-0.201	-0.453	0.374	0.477	1	0.338	-0.074	-0.293	-0.063	0.176
S1/(S1+S2)	Pearson Correlation	0.504	0.049	-0.264	-0.217	0.338	1	-0.337	-0.219	-0.332	-0.153
S2	Pearson Correlation	-0.469	-0.252	0.666	0.603	-0.074	-0.337	1	0.694	0.999	0.706
TOC	Pearson Correlation	0.098	0.283	0.158	0.045	-0.293	-0.219	0.694	1	0.698	0.586
Pg(S1+S2)	Pearson Correlation	-0.470	-0.251	0.667	0.603	-0.063	-0.332	0.999	0.698	1	0.730
S1	Pearson Correlation	-0.361	-0.169	0.504	0.433	0.176	-0.153	0.706	0.586	0.730	1

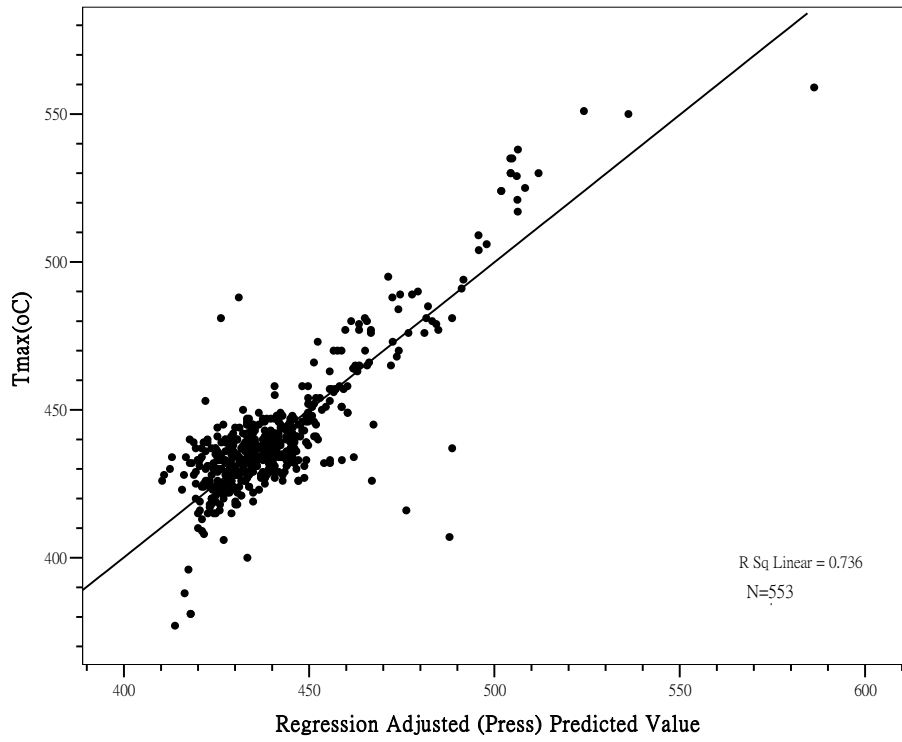
表三 各項評估參數多元線性回歸分析之 adjusted R² 值

multiple regression analysis					
Ro(%)	0.17~0.60	0.61~1.00	0.17~1.00	1.02~3.43	0.17~3.43
sample number	227	246	473	80	553
(A) adjusted R ²	0.004	0.028	0.072	0.752	0.367
(B) adjusted R ²	0.118	0.034	0.021	0.521	0.224
(C) adjusted R ²	0.193	0.254	0.462	0.932	0.804
(D) adjusted R ²	0.285	0.258	0.395	0.869	0.760

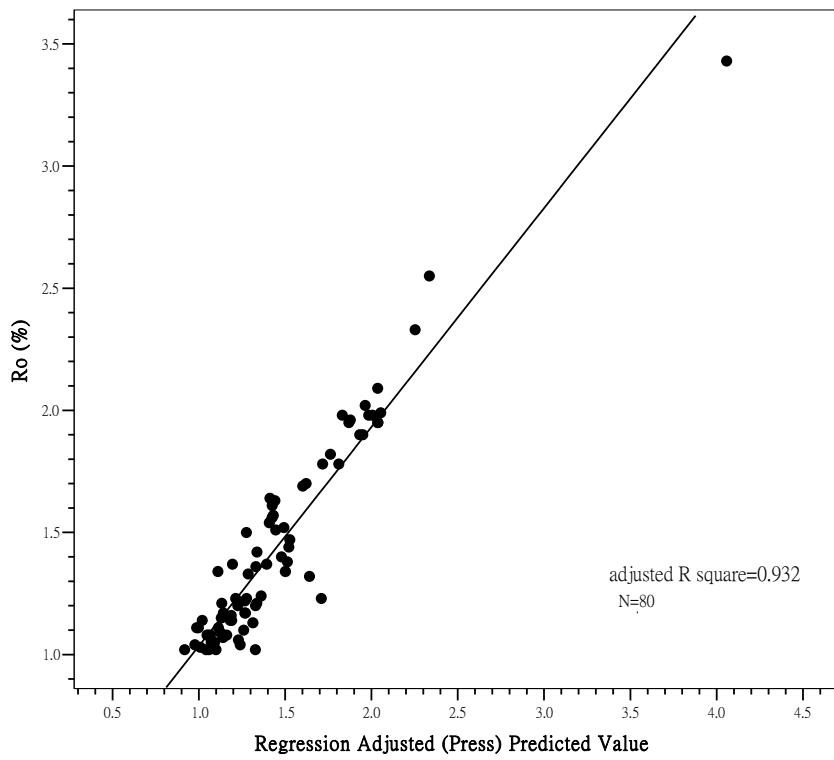
※ (A)表示以 HI、QI、BI、PI、TOC、S1、S2 等參數對 Ro 的多元迴歸分析
 ※ (B)表示以 HI、QI、BI、PI、TOC、S1、S2 等參數對 Tmax 的多元迴歸分析
 ※ (C)表示以 HI、QI、BI、PI、TOC、S1、S2、Tmax 等參數對 Ro 的多元迴歸分析
 ※ (D)表示以 HI、QI、BI、PI、TOC、S1、S2、Ro 等參數對 Tmax 的多元迴歸分析



圖一 以各項參數對Ro(%)作圖(HI、QI、BI：mg/g TOC；S1+S2、S1、mg/g；TOC：w%)



圖二 Tmax(oC) 對 Ro(%) 之線性迴歸圖



圖三 以HI、QI、BI、PI、TOC、S1、S2、Tmax等參數對Ro(%)的多元線性迴歸分析圖